化工应用数学 第五章 常微分方程求解 讲义

常微分方程的基本概念:

在化工研究中,很多时候我们所研究的变量之间的函数关系并不能直接写出来,而是要根据物理或者实际情况,先得到这些变量之间的导数的关系,然后再根据这些关系去把未知的函数关系求解出来。

下面介绍一些微分方程中的基本概念:

这种含有未知函数的导数的方程就称为微分方程。

如果未知函数是一元函数,那么这种含有未知函数导数的微分方程称为常微分方程;而若未知函数是多元函数,那么这种含有未知函数的偏导数的微分方程 称为偏微分方程。

这里, 方程中未知函数的导数的最高阶数称为微分方程的阶

$$\frac{dy}{dx} = 4x^2, \quad \frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{\mu}{m}\frac{d\theta}{dt} + \frac{g}{l}\theta = 0$$

一般的, 二阶及二阶以上的微分方程我们称为高阶微分方程。

同时,最高阶导数的指数我们称为微分方程的次数,上面两个都是一次微分方程。

能够满足微分方程的某个函数 v=f(x)叫做微分方程的一个解。

一般的,n 阶微分方程的解并不是唯一的,我们把包含 n 个独立的任意常数, 并且常数个数与微分方程的阶数相同的解称为微分方程的通解,写作:

$$y=f(x,C_1,C_2,...,C_n)$$

通解中各任意常数取特定值所得到的解称为特解。

常微分方程的解析求解-分离变量法:

若常微分方程 $dy/dx = \Phi(x,y)$ 可以将 $\Phi(x,y)$ 分解为 $x \times y$ 分别的两部分即:

$$\frac{dy}{dx} = f(x)g(y)$$

对于这样的常微分方程,就可以使用分离变量法进行求解,即把上式数学变换为:

$$\frac{dy}{g(y)} = f(x)dx$$

然后两边分别进行不定积分即可进行求解:

$$\int \frac{dy}{g(y)} = \int f(x)dx + C$$

例: 求微分方程 $\frac{dy}{dx} = 2xy$ 的通解。 解: $y = Ce^{x^2}$

而有些常微分方程虽然并不能像上面那样直接分解为 x、y 两部分, 但是可

以通过一定的数学变换转换为可分解的形式,这时我们也可以先数学变换、再进行分离变量法进行求解。这种形式的常微分方程的一个代表就是齐次微分方程,即方程形式为:

$$\frac{dy}{dx} = f\left(\frac{y}{x}\right)$$

此时,可以先进行变量代换: u=y/x,即 y=ux

$$\frac{dy}{dx} = u + x \frac{du}{dx}$$

结合原微分方程,有:

$$u + x \frac{du}{dx} = f(u)$$

上式就可以变化为可分离变量的微分方程:

$$\frac{du}{dx} = \frac{f(u) - u}{x}$$

之后再根据 f(u)-u 是否等于 0, 分别进行讨论计算

若不等于 0, 通解为:
$$x = Ce^{\varphi(\frac{y}{x})}$$
其中 $\varphi(u) = \int \frac{du}{f(u)-u}$

若等于 0, 说明 f(u)=u, 通解为: ln|x| = ln|y| + c

例: 求解微分方程:
$$x\frac{dy}{dx} = \frac{3y^3 + 6x^2y}{3x^2 + 2y^2}$$
 解: $x^3 = cy\sqrt{y^2 + 3x^2}$

常微分方程的解析求解-一阶线性方程:

另一种都具有解析解的常微分方程是一阶线性微分方程,其具有下述形式:

$$\frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x)$$

当 Q(x)等于 0 时,上述方程称为齐次的

当其不等于0时,上述方程称为非齐次的

对于齐次情况,可以使用分离变量法:

$$\frac{dy}{y} = -P(x)dx, \int \frac{dy}{y} = -\int P(x)dx$$

$$\ln y = -\int P(x)dx + \ln C,$$
齐次方程的通解为 $y = Ce^{-\int P(x)dx}$

对于非齐次情况,首先计算对应的齐次情况,然后使用常数变易法求解,下面以例子来具体讲解:

线性非齐次方程
$$\frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x)$$
.

讨论 $\because \frac{dy}{y} = \left[\frac{Q(x)}{y} - P(x)\right] dx$,

两边积分 $\ln|y| = \int \frac{Q(x)}{y} dx - \int P(x) dx$,

设 $\int \frac{Q(x)}{y} dx \, \text{为} v(x)$, $\therefore \ln|y| = v(x) - \int P(x) dx$

即 $y = e^{v(x)} e^{-\int P(x) dx}$. 非齐次方程通解形式
与齐次方程通解相比 $C \Rightarrow u(x)$

例: 求方程
$$\frac{dy}{dx} - \frac{2y}{x+1} = (x+1)^{\frac{5}{2}}$$
的通解.

解 这是非齐次线性方程 先求对应的齐次方程的通解.

$$\frac{dy}{dx} - \frac{2}{x+1}y = 0, \quad \frac{dy}{y} = \frac{2dx}{x+1}, \quad y = C(x+1)^2.$$

用常数变易法,把C换成u,即令 $y = u(x+1)^2$,

$$\frac{dy}{dx} = u'(x+1)^2 + 2u(x+1),$$

代入非齐次方程,得 $u' = (x+1)^{\frac{1}{2}}$.

两端积分,得 $u = \frac{2}{3}(x+1)^{\frac{3}{2}} + C$.

故所求通解为 $y = (x+1)^2 \left[\frac{2}{3}(x+1)^{\frac{3}{2}} + C\right].$



常微分方程的几何解法:

常微分方程的解析方法与几何方法

解析方法	几何方法
y'=f(x,y)	方向场/斜率场/线素场
y ₁ (x)	积分曲线

方向场/斜率场/线素场: 平面上,通过每点做短线素,线素的斜率等于每一

点的 f(x,y)值

积分曲线:平面上每一点都与线素场中的线素相切的一组曲线,其即为微分方程解的图像

定理: $y_1(x)$ 是方程 y'=f(x,y)的解的充分必要条件是 $y_1(x)$ 的图像是这一微分方程的积分曲线。

根据上述定理, 画出相应的积分曲线实际上也是求解常微分方程的一种方法。 如何根据微分方程画积分曲线:

- a.计算机方法:
 - 1) 平面上选择不同的点(x,y)
 - 2) 对每一点计算 f(x,y)
 - 3) 在(x,y)处画斜率为 f(x,y)的线素
- b.人工方法:
 - 1) 选择不同的斜率 C
 - 2) 画出函数 f(x,y)=C 的图像
 - 3) 在上述曲线上取不同的点画出斜率为 C 的线素

例: 通过几何法求解微分方程: $\frac{dy}{dx} = -\frac{x}{y}$ 、 $\frac{dy}{dx} = 1 + x - y$

对比两个函数的解析解: $x^2+y^2=C$ 和 $y=(xe^x+C)e^{-x}=x+Ce^{-x}$

常微分方程数值求解-尤拉法/欧拉法:

对于比较复杂的问题,若前面介绍的解析方法无法求解、几何方法求解也不 方便时,对于给定初值的问题,我们可以使用欧拉法进行数值求解。

针对一阶初值问题:

$$\begin{cases} y' = f(x, y) & (a < x < b) \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

将[a,b]进行 n 等分,所得节点记为 x_i ,对应的数值计算值为 u_i 、对应的函数值为 y_i ,记每等分为步长 h=(b-a)/n

将 y(x)在 x_i 附近进行泰勒展开,可得:

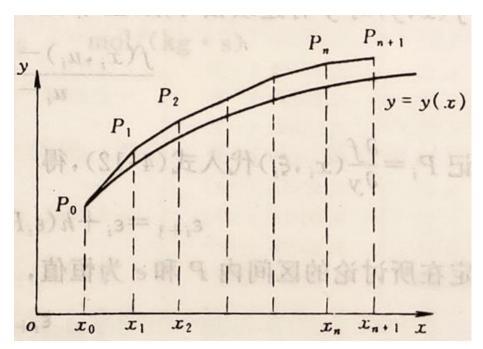
$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + (x_{i+1} - x_i)y'(x_i) + \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{1 + 2!}y''(\xi_i)$$

$$x_i \le \xi_i \le x_{i+1}$$

舍去高阶小量之后,上式可写为:

$$\begin{cases} u_{i+1} = u_i + h f(x_i, u_i) & i = 0, 1, 2, \dots, n-1 \\ u_0 = y_0 \end{cases}$$

这一公式就是显式欧拉公式。



上图为显式欧拉法求解的示意图,实际上显式欧拉法就是利用 x_i 处的斜率代替 (x_i,x_{i+1}) 整体上的斜率

同样的,我们也可以使用 x_{i+1} 处的斜率代替 (x_i,x_{i+1}) 整体上的斜率,这时数学上相当于将 y(x)在 x_{i+1} 附近进行泰勒展开:

$$y(x_i) = y(x_{i+1}) - hy'(x_{i+1}) + \frac{h^2}{2!}y''(\xi_i)$$

同样的,经数学处理可得:

$$u_{i+1} = u_i + h f(x_{i+1}, u_{i+1})$$

 $u_0 = y_0$

上式即为隐式欧拉法。

因为上式中,方程左右均含有 ui+1, 所以求解过程需要进行迭代求解,此时 迭代公式我们直接使用上式本身,即:

$$u_{i+1}^{(k+1)} = u_i + h f(x_{i+1}, u_{i+1}^k)$$

数学上,我们可以证明隐式欧拉法是绝对稳定的,但是精度上其与显示欧拉 法都只有一阶精度。为了提高精度,我们结合显式与隐式欧拉法,可以得到:

$$u_{i+1} = u_i + \frac{h}{2} [f(x_i, u_i) + f(x_{i+1}, u_{i+1})]$$

可以发现,这里我们相当于是使用 x_i 与 x_{i+1} 处的斜率的平均值代替(x_i,x_{i+1})整体上的斜率,所以上式也称为梯形法则,其具有二阶精度。

龙格-库塔法:

从前面的内容, 我们可以发现, 通过引入更多的点来代表区域中的斜率能够

有效的提高计算的精度,基于这一思想,提出了龙格-库塔方法:

$$u_{i+1} = u_i + \sum_{j=1}^{v} \omega_j K_j$$

其中:

$$K_{j} = hf\left(x_{i} + c_{j}h, u_{i} + \sum_{l=1}^{j-1} a_{jl}K_{l}\right)a_{jl}K_{l}$$

$$c_{1} = 0$$

$$x_{i} = x_{0} + ih$$

这里使用 v 个节点去表征区域上中的斜率,每个节点赋予了不同的权重 ω_j 可以发现,如果我们仅使用一个节点、同时赋予权重,那么龙格-库塔法就退化为欧拉法;同时也可以证明,之前所讲的梯形法则也是龙格-库塔法使用两个节点的一个特例。

使用 v 个节点的龙格-库塔公式一般称为 v 阶龙格-库塔公式,公式中各参数 参数的确定是使用待定系数法,将其与函数的泰勒展开式对比得到的,下面是一般使用的精度比较好的四阶龙格-库塔法公式:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = hf(x_i, y_i) \\ K_2 = hf(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2}K_1) \\ K_3 = hf(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2}K_2) \\ K_4 = hf(x_i + h, y_i + K_3) \end{cases}$$

外推法:

很容易能想到,缩小步长 h 也是提高精度的一个方式,但 h 的减小会显著的提高总体的计算量;同时,由于截断误差的存在(之前公式推导过程中忽略的高阶小项),过小的步长也可能会导致截断误差的累计,从而精度反而减小。

针对这一问题提出的方法即为外推法,即将多个步长的计算结果结合起来,以提高计算的精度。

比如,若使用欧拉法在步长 h 与 h/2 两种步长上进行计算,由于普通欧拉法是一阶精度,误差和步长成正比,有:

$$u_i \approx y(x_i) + \phi h$$

$$w_i \approx y(x_i) + \phi \frac{h}{2}$$

这里我们认为 Φ 是常数,那么通过上述两式消去 Φ 即可得到:

$$y(x_i) \approx 2w_i - u_i$$

通过这样的计算,我们可以得到高于前两者的精度。 同样的,对于梯形法则我们有:

$$u_i \approx y(x_i) + \phi h^2$$

$$w_i \approx y(x_i) + \phi \left(\frac{h}{2}\right)^2$$

从而:

$$y(x_i) \approx \frac{4w_i - u_i}{3}$$

通过这样的方式,我们就可以在不计算更小步长的情况下,提高计算的精度。 (更小的步长会带来计算量的增加以及可能的计算不稳定)

边值问题:

前面数值计算是用来解决初值问题的,这也是我们在实际常微分方程求解过程中较多遇到的问题;而实际过程中,我们还会遇到另一类的常微分方程:没有提供初值,而是提供在边界处的函数值、导数值或者两者的结合,即边值问题。

针对这类问题,常见的解决方案有两种:

- 1. 将边值问题转化为等价的初值问题
- 2. 将问题进行有限差分,仅为转化为三角矩阵的形式,从而使用追赶法进行求解。

但针对这些问题,因为这种情况一般都是对应于稳态的扩散方程等问题,所以更加推荐的方式是使用一些商业或者开源的 CFD 软件进行求解,这部分将在偏微分方程求解部分一同讲解,这里不再具体介绍。

常微分方程 Python 求解:

Python 中求解微分方程的思路有很多,这里我们使用 scipy 中提供的用于解常微分方程的函数 odeint(),其基本语法为:

scipy.integrate.odeint(func, y0, t, args=(), Dfun=None, col_deriv=0, full_output=0, ml=None, mu=None, rtol=None, atol=None, tcrit=None, h0=0.0, hmax=0.0, hmin=0.0, ixpr=0, mxstep=0, mxhnil=0, mxordn=12, mxords=5, printmessg=0, tfirst=False) [s

实际使用中,还是主要使用前三个参数,即微分方程的描写函数、初值和需要求解函数值对应的的时间点。这个函数使用过程中要求微分方程必须化为标准

形式,并且可以处理常微分方程组的问题。(高阶微分方程可以转换为微分方程 组来解决)

例: 求解 dy/dx=x

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import odeint

def diff(y, x):# dy/dx = x
    return x

x = np.linspace(0, 10, 100) # 给出x范围
y = odeint(diff, 0, x) # 设初值为0
plt.plot(x, y[:, 0])
plt.grid()
plt.show()
```

例:求解单摆运动:
$$\frac{\mathrm{d}^2\theta}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{g}{l}\theta$$

引入角速度 ω,将二阶常微分方程转化为一阶常微分方程组:

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} = \omega, \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}t} = -\frac{g}{l}\theta$$

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt ;
from scipy.integrate import odeint

g = 9.8
l = 1

def diff2(d_list, t):
    omega, theta = d_list
    return np.array([-g/l*theta, omega])
t = np.linspace(0, 20, 2000)
result = odeint(diff2, [0, 35/180*np.pi], t)
# 结果是一个两列的矩阵, odeint中第二个是初始单摆角度35度
plt.plot(t, result[:, 0]) # 输出omega随时变化曲线
plt.plot(t, result[:, 1]) # 输出theta随时变化曲线
plt.show()
```